

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DE UM CLASSIFICADOR QUÂNTICO SUPERVISIONADO

Luiz Henrique Prudencio dos Santos ¹, Roberto Baginski Batista Santos ²

¹ Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Universitário FEI

² Departamento de Física, Centro Universitário FEI

lhenriquepsantos@hotmail.com, rsantos@fei.edu.br

Resumo: Este trabalho tem como objetivo avaliar experimentalmente a capacidade de um processador quântico realizar uma tarefa de classificação binária supervisionada com a base de dados titanic3 de passageiros do naufrágio do Titanic em 1912. Os modelos quânticos de classificadores foram construídos usando a classe VQC disponível no pacote Qiskit para Python. Foi realizada uma comparação do modelo quântico em relação a um classificador clássico avaliando a acurácia, o número de parâmetros e a densidade de acurácia conforme variava-se o tamanho do conjunto de dados usados no treinamento. Como resultado ambos apresentaram acurácias semelhantes, mas o modelo quântico foi mais eficiente, apresentando uma densidade de acurácia superior, precisando de menos parâmetros do que o modelo clássico para fazer previsões com nível semelhante de acurácia.

1. Introdução

A computação quântica pode apresentar algumas vantagens quando comparada à computação clássica em relação ao aprendizado de máquina (machine learning). Apesar de mais sensíveis, modelos quânticos podem ter mais facilidade para aprender com menos dados disponíveis do que seus concorrentes tradicionais [1,2]. Isso ocorre devido aos fenômenos da mecânica quântica que um processador quântico pode utilizar durante seu funcionamento, sendo eles: a superposição e o emaranhamento. A utilização destes fenômenos quânticos como recursos computacionais poderia melhorar a eficiência computacional ao lidar com estruturas complexas [1,2].

Neste trabalho, implementamos um conjunto de classificadores quânticos baseados em uma combinação de codificadores (*encodings*), que traduzem o valor dos atributos do conjunto de dados em estados quânticos, e circuitos variacionais, que possuem parâmetros a serem otimizados. A otimização destes parâmetros para um dado conjunto de dados corresponde à aprendizagem [3]. Os classificadores quânticos foram testados com a base de dados titanic3 e o classificador quântico de melhor desempenho foi comparado a um classificador clássico.

2. Metodologia

Os classificadores quânticos foram construídos com as combinações de codificadores e circuitos variacionais indicadas na tabela 1. Enquanto o codificador *ZFeatureMap* é baseado em portas de Pauli, o codificador *ZZFeatureMap* acrescenta portas condicionais *cX* que criam emaranhamento entre os qubits [3]. O codificador transforma cada instância do conjunto de dados em um estado quântico que depende dos valores dos atributos da instância. No caso do codificador *ZFeatureMap*, o estado que representa um

dado é um estado produto em que o estado de cada qubit é definido independentemente dos demais qubits. No codificador *ZZFeatureMap*, o emaranhamento introduz correlações não clássicas entre os qubits e o estado do sistema não pode ser descrito como o produto de estados que descreveriam cada qubit independentemente.

Os circuitos variacionais usados neste trabalho são baseados em portas de rotação R_y parametrizadas por um conjunto de ângulos [3]. O número de portas de rotação usadas define o número de parâmetros do modelo.

Os classificadores foram implementados usando o a classe VQC do pacote Qiskit. A otimização dos parâmetros variacionais foi realizada classicamente usando o otimizador COBYLA do pacote SciPy e a entropia cruzada foi a grandeza minimizada durante a otimização. Em cada passo do processo de otimização, o circuito quântico foi executado 4000 vezes para gerar a distribuição de probabilidades necessária para avaliação da entropia cruzada.

Para os testes, foi usada a base de dados titanic3 de passageiros do Titanic. Inicialmente, foi feita uma análise dos dados a fim de selecionar apenas os atributos com maior correlação com o atributo “survived”. Como cada atributo é representado por um qubit e como os processadores quânticos disponíveis gratuitamente na plataforma IBM Quantum possuíam poucos qubits, esta etapa permitiu reduzir o número de qubits necessários, viabilizando os experimentos. A acurácia das previsões e o número de parâmetros do modelo foram usados como métricas para avaliar o desempenho dos classificadores.

Tabela 1. Classificadores quânticos usados no projeto

Modelo	Codificador	Parâmetros
Z8	<i>ZFeatureMap</i>	8
Z12	<i>ZFeatureMap</i>	12
Z16	<i>ZFeatureMap</i>	16
Z20	<i>ZFeatureMap</i>	20
Z24	<i>ZFeatureMap</i>	24
ZZ8	<i>ZZFeatureMap</i>	8
ZZ12	<i>ZZFeatureMap</i>	12
ZZ16	<i>ZZFeatureMap</i>	16
ZZ20	<i>ZZFeatureMap</i>	20
ZZ24	<i>ZZFeatureMap</i>	24

Fonte: Autoria própria.

Os classificadores quânticos foram treinados com 70% do conjunto de dados e otimizados por 150 épocas. A acurácia das previsões realizadas sobre os demais 30% dos dados reservados para teste foi o parâmetro de desempenho considerado.

Após a seleção do classificador quântico de melhor desempenho, este foi comparado com um classificador

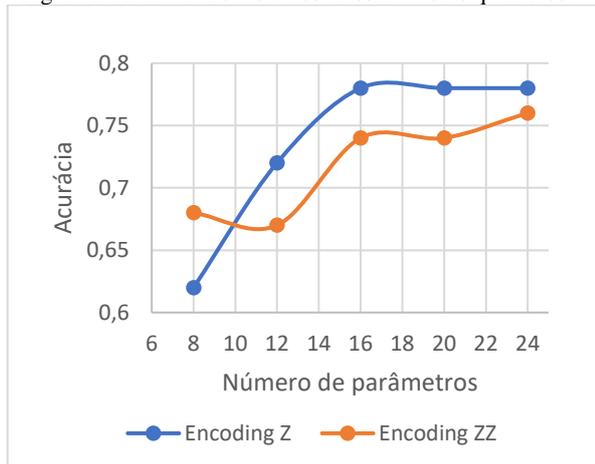
clássico SVC implementado no pacote scikit-learn baseado em uma máquina de vetores de suporte (SVM). Nesta comparação, cada classificador foi treinado com uma fração t dos dados (*train size*) e foi testado fazendo previsões sobre a fração $1 - t$ dos dados que foi reservada para o teste.

3. Resultados

A análise da base de dados titanic3 permitiu concluir que os atributos com maior correlação ao atributo “survived” foram: “fare”, “pclass”, “age” e “sex”. Desta forma, apenas quatro qubits foram necessários.

A figura 1 apresenta a acurácia no teste de cada classificador quântico em função do número de parâmetros variacionais. Apesar de usar o emaranhamento como recurso computacional, os modelos com codificação *ZZFeatureMap* não apresentaram vantagem em comparação aos modelos com codificação *ZFeatureMap*. A curva de acurácia dos modelos com codificação *ZZFeatureMap* parece estabilizar um pouco abaixo do valor atingido pelos modelos com codificação *ZFeatureMap* quando o número de parâmetros variacionais aumenta.

Figura 1. Acurácia no teste dos classificadores quânticos.



Fonte: autoria própria.

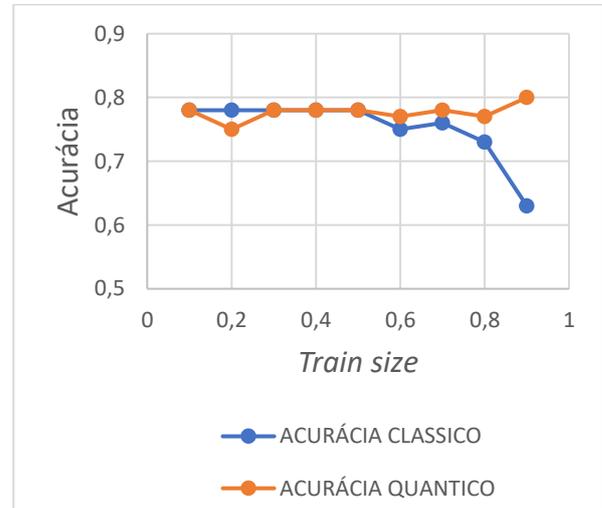
Como a acurácia no teste parece saturar para modelos com 16 ou mais parâmetros, o modelo Z20 foi selecionado como o de melhor desempenho para ser comparado ao classificador clássico.

A figura 2 mostra a acurácia no teste do classificador quântico Z20 e do classificador clássico em função da fração t de dados usados no treinamento. Os desempenhos são semelhantes, mas a acurácia do classificador clássico parece diminuir à medida que mais dados são usados no treinamento. Acreditamos que esta degradação do desempenho do classificador clássico sugere que o classificador clássico pode necessitar de mais épocas de treinamento do que as 150 usadas, isto é, o classificador quântico teria capacidade de aprender com menos épocas de aprendizagem.

Quanto ao número de parâmetros utilizados em cada modelo, o classificador clássico precisou aprender de 524 parâmetros (para $t = 0,10$) até 4700 parâmetros (para $t = 0,90$) para apresentar uma acurácia semelhante à

demonstrada pelo classificador quântico Z20, que precisa aprender apenas 20 parâmetros. Isso significa que a densidade de acurácia, acurácia normalizada pelo número de parâmetros, do classificador quântico é muito maior do que a do classificador clássico.

Figura 2. Acurácia no teste do classificador quântico Z20 e do classificador clássico.



Fonte: autoria própria.

4. Conclusões

Implementamos classificadores quânticos que usam circuitos codificadores com e sem emaranhamento usando quatro qubits, treinamos estes classificadores com 70% da base de dados titanic3 e os testamos com os 30% restantes da base de dados. O classificador Z20 de 20 parâmetros e sem emaranhamento apresentou a maior acurácia no teste após 150 épocas de treinamento. Este classificador apresentou acurácia semelhante à acurácia de um classificador clássico para *train sizes* de 10% a 80% dos dados, precisando aprender apenas 20 parâmetros em comparação com o classificador clássico que precisou aprender de 524 a 4700 parâmetros para exibir uma acurácia semelhante.

Concluimos que é possível realizar uma tarefa de classificação binária usando um modelo quântico que apresenta acurácia semelhante ao de um classificador clássico necessitando aprender um número significativamente menor de parâmetros.

5. Referências

- [1] DUNJKO, V.; BRIEGEL, H. J. **Reports on Progress in Physics** v.81, p.074001, 2018.
- [2] SCHULD, M.; PETRUCCIONE, F. **Machine Learning with Quantum Computers**. 2.ed. Cham: Springer, 2021.
- [3] HAVLÍČEK, V. et al. **Nature** v.567, p.209, 2019.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pela concessão da bolsa de iniciação científica e à IBM por liberar o material disponível para a simulação de computadores quânticos

¹ Aluno de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 04/23 a 03/24